2.3 양자역학의 수학적 체계

• 디락의 브라-켓 표시

디락(P.A.M. Dirac)은 상태를 나타내는 파동함수를 상태공간에서의 하나의 벡터로 생각하여 켓벡터(ket vector)로 명명하였고, 이러한 벡터와 내적하여 스칼라를 주는 짝 벡터를 생각하여 이를 브라벡터(bra vector)라고 명명하였다. 이는 꺽쇠 괄호<>의 영문명 브라켓(bracket)에서 각각 뒷부분과 앞부분을 따온 것이다. 그리하여 브라벡터 $<\psi|$ 와 켓벡터 $|\phi>$ 의 곱을 벡터의 내적으로서 다음과 같이 정의하였다.

$$<\psi|\phi> \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*(x)\,\phi(x) \;\in\; \mathbb{C}$$

여기서 상태 벡터에 연산자를 작용할 경우는 켓벡터 앞에 곱으로 표시하였다: $A\,|\phi>$.
이렇게 연산자가 작용한 켓벡터는 새로운 켁벡터가 되며, 이러한 새로운 켓벡터에 브라벡터로 내적을 할 경우는 다음과 같이 표시하였다.

$$<\psi|\,A\,|\phi> \;=\; <\psi|\,A\,\phi> \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*(x)\,A\phi(x)$$

그리고 연산자가 켓벡터에 작용하지 않고 브라벡터에 작용하는 경우는 수반 연산자(adjoint operator)라 하여 대거(dagger: †)를 첨자로 덧붙여 표시하고, 다음과 같이 정의하였다.

$$<A^\dagger\psi\,|\,\phi> \;:=\; <\psi\,|\,A\,\phi>$$

여기서 연산자가 수반 연산자와 같을 때, $A = A^\dagger$, 우리는 이러한 연산자를 자기수반 연산자(self-adjoint operator)라고 부르며, 물리학에서는 자기수반 연산자를 에르미트 연산자(Hermitian operator)라고 한다.
이상의 표현을 적용하면, 상수 c 의 경우 $|\,c\phi> \;= c\,|\,\phi>$로 $<c\phi\,| \;= c^*<\phi\,|$ 로 됨을 알 수 있으며 이 관계는 향후 자주 사용하게 될 것이다.
그리고 벡터의 크기(norm)는 다음과 같이 정의하였다.

$$\|\psi\| \;=\; <\psi\,|\,\psi> \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^*(x)\,\psi(x) \;\in\; \mathbb{R}$$

• 폰 노이만의 수학적 체계

1927년 폰 노이만(J. von Neumann)은 하이젠베르크의 행렬역학에서 나타나는 행렬의 특성에서 유추한 분광정리(spectral theorem)로부터 물리적 관측가능량(physical observable)은 자기수반 연산자로 주어지고, 관측가능량의 측정치는 이러한 자기수반 연산자의 스펙트럼(spectrum)에 속한다고 하였다. 분광정리는 에르미트 행렬(Hermitian matrix)이 실수(real number)의 고유값들(eigenvalues)과 서로 직교하는 고유벡터들 (eigenvectors)을 갖는다는 특성을 연산자의 경우로 일반화하였을 때, 에르미트 행렬은 자기수반 연산자에 대응하고 에르미트 행렬의 고유값들의 집합은 이러한 자기수반 연산자의 스펙트럼에 대응된다는 것이다. 여기서, 자기수반 연산자의 스펙트럼에 속하는 양은 행렬의 고유값에 해당하고 그 고유값에 해당하는 고유벡터가 존재하므로, 이러한 고유벡터는 그 고유값이 물리적 관측가능량의 측정치로 주어지는 상태벡터(state vector)에 대응한다. 물리적 관측가능량의 측정치

는 항상 실수로 주어지므로, 에르미트 행렬의 고유값이 실수인 것과 일치하며, 이는 자기수반 연산자의 스펙트럼이 실수들로 주어짐과 일치한다. 이상을 요약하면 다음과 같이 기술할 수 있다.

모든 물리적 관측가능량은 자기수반 연산자, 즉 에르미트 연산자로 주어지며, 주어진 물리적 상태에 대한 어떤 관측가능량의 측정치는 해당하는 에르미트 연산자의 스펙트럼에 속하는 실수(고유값)이며, 이러한 고유값을 갖는 고유벡터는 고유값을 측정치로 주는 물리적 상태를 표시하는 상태벡터에 해당한다.

여기서 연산자가 작용하는 벡터공간을 우리는 힐베르트 공간(Hilbert space)이라 부르며, 양자역학적 상태 공간(state space)은 힐베르트 공간에 속한다. 힐베르트 공간은 어떤 벡터쌍(α, β)에 대해서도 스칼라 곱($<\alpha \mid \beta>$)이 정의되어 있는 벡터공간이다. 위에서 언급한 디락의 브라-켓 내적도 이러한 힐베르트 공간에서의 스칼라 곱에 해당한다.

• 양자역학의 체계

현재까지 우리가 배운 내용을 요약하면, 양자역학은 다음과 같은 체계로 이루어져 있음을 알 수 있다.

1) 모든 물리적 관측가능량 A는 에르미트 연산자(자기수반 연산자)로 주어진다.

$$A^{\dagger} = A$$

2) 물리적 관측가능량의 측정값은 이러한 에르미트 연산자의 스펙트럼(고유값의 집합)에 속하며 실수이다.

$$A \mid \psi_n > \ = a_n \mid \psi_n >, \ \ a_n = a_n^* \in \triangle \ (A \text{ 의 스펙트럼})$$

3) 임의의 물리적 상태 $\mid \Phi >$ 는 힐베르트 공간의 벡터로 표시되며, 어떤 물리적 관측가능량 A를 이 상태에 대해 측정한다면, 측정 후 물리적 상태는 에르미트 연산자 A의 고유상태에 있게 된다. 이때 주어진 상태 $\mid \Phi >$ 에서 A의 고유값 a_n을 측정할 확률은 상태 $\mid \Phi >$ 에서 고유상태 $\mid \psi_n >$ 가 존재할 확률과 같으며, 이는 주어진 상태 함수를 고유상태 함수들로 전개하였을 때 해당 전개계수(expansion coefficient)의 절대값의 제곱과 같다.

$$\mid \Phi > \ = \sum_n c_n \mid \psi_n >, \ c_n \in \mathbb{C}, \text{ 이때 측정값 } a_n \text{을 얻을 확률 } P_n = \ \mid c_n \mid^2 \text{ 이다.}$$

여기서 $< \Phi \mid \Phi > \ = 1$ 로 주어지며, $< \psi_m \mid \psi_n > \ = \delta_{mn}$ 을 만족한다. (고유값이 연속적으로 주어지는 경우는 나중에 다루기로 하겠다.) 그러므로 어떤 주어진 상태에서 물리적 관측가능량 A의 기댓값은 다음과 같이 주어진다.

$$< A > \ = \ < \Phi \mid A \mid \Phi > \ = \sum_n P_n a_n = \sum_n \mid c_n \mid^2 a_n \quad , \quad \sum_n \mid c_n \mid^2 = 1$$

위 마지막 식은 측정 가능한 값들의 확률을 모두 더하면 1이 됨을 보여주므로, 이러한 해석이 맞음을 확인하여 주고 있다. 한편, 위에서처럼 고유함수로 전개하지 않더라도 브라-켓 내적 정의에 의해서 기댓값은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$< A > \; = \; < \Phi \mid A \mid \Phi > \; = \; \int_{-\infty}^{\infty} dx \; \Phi^*(x,t) \, A \, \Phi(x,t)$$

그리고 기댓값에 대한 이러한 정의는 1장의 마지막 부분에서 언급된 보른의 확률론적 해석과도 일치함을 보여준다.

4) 주어진 물리적 상태의 시간에 따른 변화는 슈뢰딩거 방정식으로 주어진다.

$$H \mid \Phi > \; = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mid \Phi > \quad \longleftrightarrow \quad H \Phi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x,t)$$

여기서 하밀토니안 H 는 슈뢰딩거의 규칙에 의해 주어진다: $H(x,p) = H(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})$.

즉, 물리적 상태의 시간변화는 다음의 슈뢰딩거 방정식에 의하여 결정된다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x,t) + V(x) \, \Phi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x,t)$$

• 기댓값의 시간변화와 에렌페스트의 정리

어떤 관측가능량 A 의 기댓값은 시간에 따라 어떻게 변화할까? 우리는 슈뢰딩거 방정식을 사용하여 이에 대한 결과를 다음과 같이 이끌어낼 수 있다. 먼저 기댓값의 정의로부터 주어진 상태 ψ 에 대한 시간 변화는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\frac{d < A >}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^* A \, \psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* A \psi)$$

여기서, $\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* A \psi) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} A \psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi + \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t}$ 이고, 슈뢰딩거 방정식을 다음과 같이 다시 쓰면, $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H\psi$, 이의 복소공액 표현은 $\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (H\psi)^*$ 이 되므로,

$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* A \psi) = \frac{i}{\hbar} (H\psi)^* A \psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* A \, H \psi$ 가 된다. 즉,

$$\frac{d < A >}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{i}{\hbar} (H\psi)^* A \psi + \psi^* \frac{\partial A}{\partial t} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* A H \psi \right)$$

$$= \frac{i}{\hbar} < H\psi \mid A\psi > \; + \; < \psi \mid \frac{\partial A}{\partial t} \mid \psi > \; - \frac{i}{\hbar} < \psi \mid A \, H \mid \psi >$$

로 쓸 수 있다. 여기서 하밀토니안은 에르미트 연산자(자기수반 연산자: $H = H^\dagger$)이므로 $< H\psi \mid A\psi > \; = \; < \psi \mid HA \mid \psi >$ 로 쓸 수 있다. 그러므로 기댓값의 시간변화는

$$\frac{d < A >}{dt} = \frac{i}{\hbar} < [H, A] > \; + \; < \frac{\partial A}{\partial t} >$$

로 쓸 수 있다. 여기서, 우리는 교환자(commutator)의 정의, $[H, A] := HA - AH$ 를 사용하였고, 관측가능량 A 가 직접적으로 시간에 무관할 경우,

$\frac{d < A >}{dt} = \frac{i}{\hbar} < [H, A] >$ 로 주어짐을 알 수 있다.

그러므로 A 가 직접적으로 시간에 무관하고, $[H, A] = 0$ 인 경우, $\frac{d < A >}{dt} = 0$ 이 된다.

그러므로 A가 직접적으로 시간에 무관하고, 하밀토니안과 가환 ($[H, A] = 0$)인 경우, 우리는 A를 운동상수(constant of motion)라고 부른다.
이상의 결과를 A가 운동량 p인 경우에 적용하여 보면, p의 직접적인 시간의존도는 없으므로 $\frac{d<p>}{dt} = \frac{i}{\hbar} < [H, p] >$ 로 주어진다. 여기서 하밀토니안을 $\frac{p^2}{2m} + V(x)$ 로 표현하면, $\frac{d<p>}{dt} = \frac{i}{\hbar} < [V(x), p] >$ 로 된다. 한편, p를 x좌표계에서 표현하면, $p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ 로 주어지므로, $\frac{d<p>}{dt} = - < \frac{\partial V}{\partial x} >$ 가 되어 고전적인 결과인 $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ 와 같은 관계를 만족함을 보여준다. 마찬가지로 우리는 $\frac{d<x>}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, x] = \frac{<p>}{m}$ 이 됨을 보일 수 있으므로 고전적인 관계식과 동일함을 알 수 있다. 다만 고전적인 관계식이 관측가능량 자체에 대한 방정식이라면, 양자역학의 경우에는 그 기댓값이 동일한 관계식을 만족함을 알 수 있다. 이와 같이 양자역학에서 그 기댓값을 취할 경우 고전적인 관계식을 만족하는 것을 일컫어 에렌페스트의 정리(Ehrenfest's theorem)라고 부른다.
